



TITLE:

平衡状態への近迫(計算機)(短期研究会"一次元系の非線型力学",基研研究会報告)

AUTHOR(S):

小暮, 陽三

CITATION:

小暮, 陽三. 平衡状態への近迫(計算機)(短期研究会"一次元系の非線型力学",基研研究会報告). 物性研究 1967, 8(2): B33-B40

ISSUE DATE:

1967-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/86042>

RIGHT:

Shock Waves (Interscience Pub., New York) § II and § III A.
(1948)

A. Jeffrey and T. Taniuti: Nonlinear Wave Propagation
with Applications to Physics and Magneto-hydrodynamics,
Part I. (Academic Press, New York) 1964

2) E. Hopf : Comm. Pure. Appl. Math.

3) A. Jeffrey and T. Taniuti : 上掲書 .

4) D. J. Kortwey and G. deVries; Phil. Mag. series 5, 39
(1895), 422

5) N. J. Zabusky and M. D. Kruskal: Phys. Rev. Lett. 15
(1965), 240

6) N. J. Zabusky: preprint

7) 近似的なとりあつかいとしては,

G. B. Whitham: Proc. Roy. Soc. A 283(1965) 238.

G. B. Whitham: J. Fluid Mech, 22(1965)273.

J. C. Luke: Proc. Roy. Soc. A 292(1966) 403.

8) N. Yajima, A. Outi and T. Taniuti, Prog. Theor. Phys.
35(1966) 1142.

平 衡 状 態 へ の 近 迫 (計 算 機)

小 暮 陽 三 (都立航空工専)

非線型振動子系におけるエネルギー分配やエルゴード性については、計算機による研究が最近活潑に実行されている。その結果、非線型項を摂動とする従来の方法にかなり深刻な疑問を与えているので、一次元鎖をモデルとしたこの方面の研究の Review を行い、特に R.S. Northcote, R.B. Potts の興味深い結果を報告した。最初にこの種の計算を実行したのは E. Fermi, J. Pasta, S. Ulam¹⁾(以下 FPU と称する)である。一次元鎖の粒子間力がフ

一次元素の非線型力学

フックの力と弱い非線型力である場合に、線形項の Normal mode を選んでエネルギーを与えると、この振動子系で、エネルギーは他の mode にほとんど分配されず、初期に励起された mode は周期運動を繰り返してエルゴード性を示さないことを確かめた。粒子数 32 個で、ハミルトニアンに含まれる非線型項は 3 次、および 4 次の 2 つの場合を計算している。この結果は非線型項によって必ずしもエルゴード性が保証されないことを示唆している。FPU に続いて同じ問題を J. Ford²⁾ がやはり計算機によって精力的に検討している。すなわち

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N (p_k^2 + \omega_k^2 q_k^2) + \alpha \sum_{j,k,l}^N A_{jkl} q_j q_k q_l, \quad (1)$$

のハミルトニアンをもつ振動子では Resonant Condition

$$\sum_k n_k \omega_k \lesssim \alpha, \quad (2)$$

を $\{\omega_k\}$ が満足する場合のみ、mode 間のエネルギー分配が起ってエルゴード性を呈する。 n_k は整数で例えば 2 個の振動子系では $\omega_1 - 2\omega_2 \lesssim \alpha$, 3 個では $3\omega_1 + 2\omega_2 - \omega_3 \lesssim \alpha$ 等を意味する。Resonant Condition は Wigner-Brillouin の解を 2 個の振動子系について求めるとき、導かれる条件で $N=2, 3, 5, 15$, $\alpha = \frac{1}{4}$ の場合を計算機にかけて確かめている。しかし Ford の議論は H に 3 次の非線型項という特定の形を仮定している点や、弱い非線型力をとっている点でかなり制限があって、E. A. Jackson が指摘しているように一般的な結論を下す訳にはいかない。さらに初期条件としてエネルギーをどの mode に与えるかによっても、エネルギー分配の有様、平衡状態への近迫も影響を受けることが予想される。以上の経過を基礎として Northcote と Potts³⁾ は次のモデルをとり上げている。図 1 のような一次元鎖をとる。各粒子の有効直径を d とし、力の定数 r , 自然長 $(a-d)$ のフック力で粒子は連結しておく。このモデルの特徴は衝突が起らない間は線型定差方程式に従って運動するので計算は簡単であること、非線型力は剛体球ポテンシャルによる弾性衝突によって作用するため、衝突の前後で、速度が互い交換するだけで衝突の効果を取り入れることができ、非線型項による影響は著しく簡単に解かれる。ま

た初期条件として特定の mode を励起するときに，そのエネルギーの大小によって非線型力の強弱を加減できる利点がある。図 2 は粒子間の相互作用のエネルギー

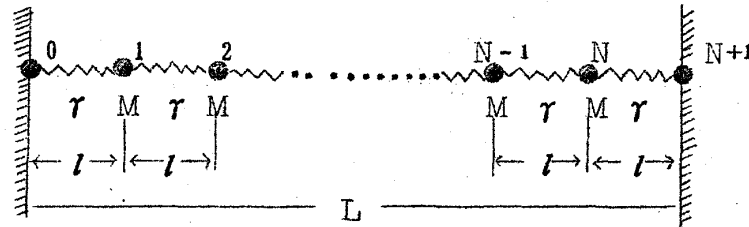
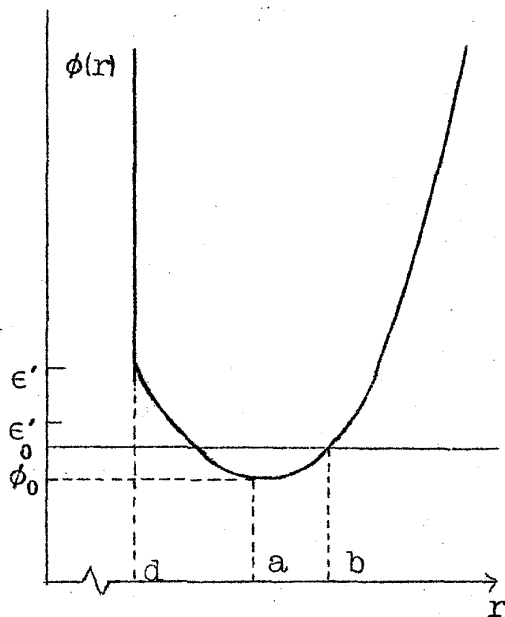


図 1. モデル



第 1 表

M	$3.0 \times 10^{-23} \text{ g}$
r	400 dyn/cm
ℓ	$4.00 \times 10^{-8} \text{ cm}$
a	$3.995 \times 10^{-8} \text{ cm}$
d	$3.400 \times 10^{-8} \text{ cm}$

図 2. 粒子間の相互作用のエネルギー

ルギーを表わし， ϵ'' は $0.7 \times 10^{-14} \text{ erg}$ ， ϵ' は $0.4 \times 10^{-14} \text{ erg}$ として非線型力の大小による影響を議論できる。なお数値計算のパラメータは第一表に示す。このモデルは上に記した利点の他に物理的にも現実性のあるモデルと云えよう。

$N+2$ 個の粒子の両端を固定し，図 1 のように番号をつける。 j 番目の粒子の平衡点からの変位を x_j とすると， $j-1$ ， j 粒子の衝突条件は

$$x_j - x_{j-1} + \ell - d = 0 \quad (j=1, 2, \dots, N+1) \quad (3)$$

であり、衝突しない時間では $x_j - x_{j-1} + \ell - d > 0$ が成り立ち、この間の運動方程式は

$$\ddot{\mathbf{x}} + \mathbf{R}\mathbf{x} = 0 \quad (4)$$

で与えられる。 \mathbf{x} は各粒子の変位を成分とする N 次元配位空間のベクトルであり、 \mathbf{R} は一次元鎖で最近接粒子間にフック力のみ作用するときの $N \times N$ 次行列である。(4)の解は

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{x}(t) &= \cos[\mathbf{R}^{\frac{1}{2}}(t-t_0)]\mathbf{x}(t_0) + \mathbf{R}^{-\frac{1}{2}}\sin[\mathbf{R}^{\frac{1}{2}}(t-t_0)]\dot{\mathbf{x}}(t_0), \\ \dot{\mathbf{x}}(t) &= -\mathbf{R}^{\frac{1}{2}}\sin[\mathbf{R}^{\frac{1}{2}}(t-t_0)]\mathbf{x}(t_0) + \cos[\mathbf{R}^{\frac{1}{2}}(t-t_0)]\dot{\mathbf{x}}(t_0). \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

である。(5)を書き変えて

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}(t) \\ \dot{\mathbf{x}}(t) \end{pmatrix} = \mathbf{A}(t-t_0) \begin{pmatrix} \mathbf{x}(t_0) \\ \dot{\mathbf{x}}(t_0) \end{pmatrix} \quad (6)$$

(6)の変換行列 $\mathbf{A}(t-t_0)$ の要素は(5)と比較すれば明かである。計算を実行するには、いま t_0 から出発して適当な Time interval h をパラメータとして t_0+h のときの $\mathbf{x}(t_0+h)$, $\dot{\mathbf{x}}(t_0+h)$ の値を変換(6)によって知る。このときの $\mathbf{x}(t_0+h)$ が衝突条件を満足しなければ、そのまま線型運動を続け、 $(\mathbf{x}(t_0+h), \dot{\mathbf{x}}(t_0+h)) \rightarrow (\mathbf{x}(t_0+2h), \dot{\mathbf{x}}(t_0+2h))$ の変換 $\mathbf{A}(h)$ を施し、以下同様に衝突条件を満足するまで変換を逐次実行する。仮に t_0+mh まではその都度衝突がどこにも起っていないことを確かめ、 $t_0+(m+1)h$ では $x_j - x_{j-1} + \ell - d < 0$ になったとする。 t_0+mh と $t_0+(m+1)h$ の間をニュートンの補間法によって衝突する時間を求める。さらにこの時間を新らしく出発点として速度交換則

$\dot{x}_{j-1}(t+) = \dot{x}_j(t-)$, $\dot{x}_j(t+) = \dot{x}_{j-1}(t-)$ (ただし $\dot{x}_1(t+) = -\dot{x}_1(t-)$, $\dot{x}_N(t+) = -\dot{x}_N(t-)$) を考慮して、前と同じく繰返して次の衝突までの $\mathbf{x}(t)$, $\dot{\mathbf{x}}(t)$ を計算

する。この計算を精密化するにはパラメータ h を調和級数で漸減させて衝突時間を決めればよろしい。計算機によってこの計算を実行するには、衝突と衝

突との間が線型振動であるため著しく簡単である。

体系の全エネルギー $E = \frac{1}{2} M (\dot{\mathbf{x}}' \mathbf{R} \dot{\mathbf{x}} + \dot{\mathbf{x}}' \dot{\mathbf{x}})$ である。Linear system の Normal Coordinate をとって

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (\omega_i^2 q_i^2 + \dot{q}_i^2) \quad (7)$$

$j-1$, j 粒子が衝突して i -mode のエネルギー E_i が ΔE_i 変化すると

$$\left. \begin{aligned} \Delta E_i &= \frac{1}{2} M \Delta \dot{q}_i(t) [2\dot{q}_i(t-) + \Delta \dot{q}_i(t-)] \\ \Delta \dot{q}_i(t) &= [\gamma(N+1)/2M]^{\frac{1}{2}} \omega_i \cos\left[\frac{1}{2}i(2j-1)\pi/(N+1)\right] |\Delta \dot{\mathbf{x}}_j| \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

で与えられる。すなわち j 粒子の衝突による速度変化が解ると ΔE_i は決まる。

Δ 速度の変化 $\Delta \dot{\mathbf{x}}_j = \dot{\mathbf{x}}_j(t+) - \dot{\mathbf{x}}_j(t-)$ は先の変換と、衝突による速度交換則で定まるから、したがって ΔE_i を知ることができる。 $N=15$ として、パラメータを第1表に従ってとり、図3, 図4の結果を得る。図3は最低振動数の

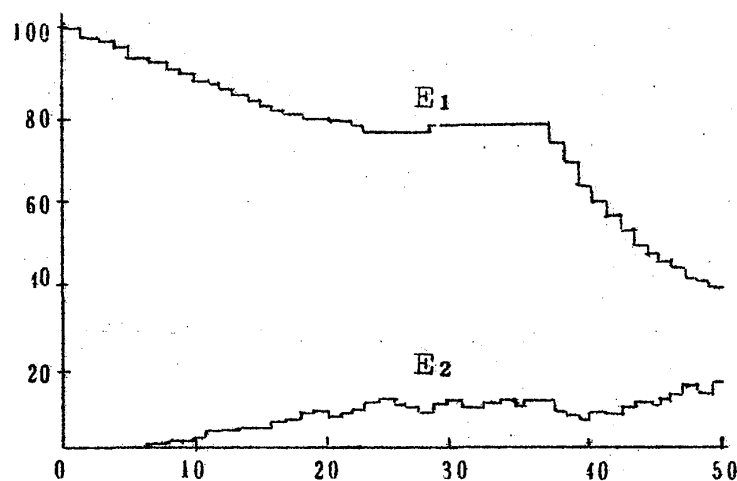


図3. 横軸は衝突回数, 縦軸はエネルギー(%),

mode にエネルギーを与えたとき, そのエネルギー E_1 の減少と次の振動数 ω_2 の mode のエネルギーの増加を表わしている。初期に励起した運動が仮に右へ一様な粒子速度を与えた運動とすると右の壁との衝突が最初に取り各粒子の衝突が次々に起って, 左へおよそ一様な運動を行うようになる。これが衝

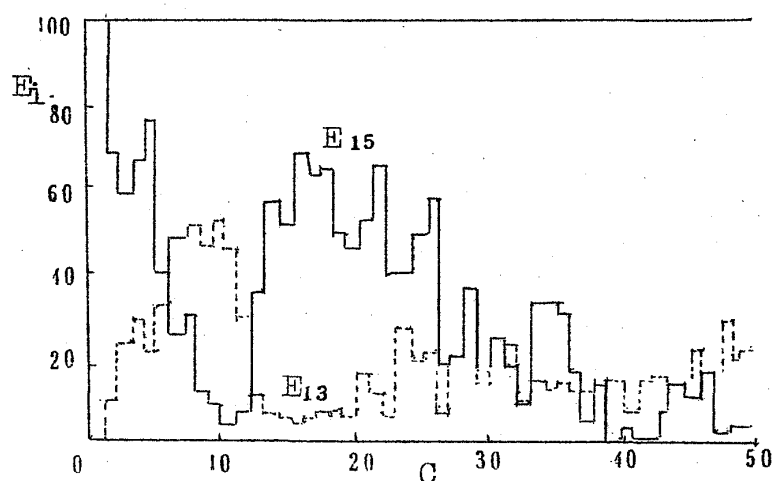


図 4.

突回数 20 回から 37 回に相当する間であって図 3 で E_1 が減少しないほぼ一定の範囲があるのはこのためと解釈できる。図 4 は最高振動数 ω_{15} の mode を励起してそのエネルギーが他の mode に分配され、とくに ω_{13} の mode のエネルギーと比べた結果である。図 3 と比較するとエネルギー分配が速かに起っている。初期エネルギー値として ϵ'' をとると、図 3, 4 の ϵ' をとった場合よりも非線型効果が大きいのでエネルギー分配は急速に起ることも確かめられる。以上の結論は、衝突回数 1500 回までの範囲を計算している。また熱力学変数として平均温度、圧力、運動量自己相関数を $N=31$ 個について計算したのが、それぞれ図 5, 6, 7 である。

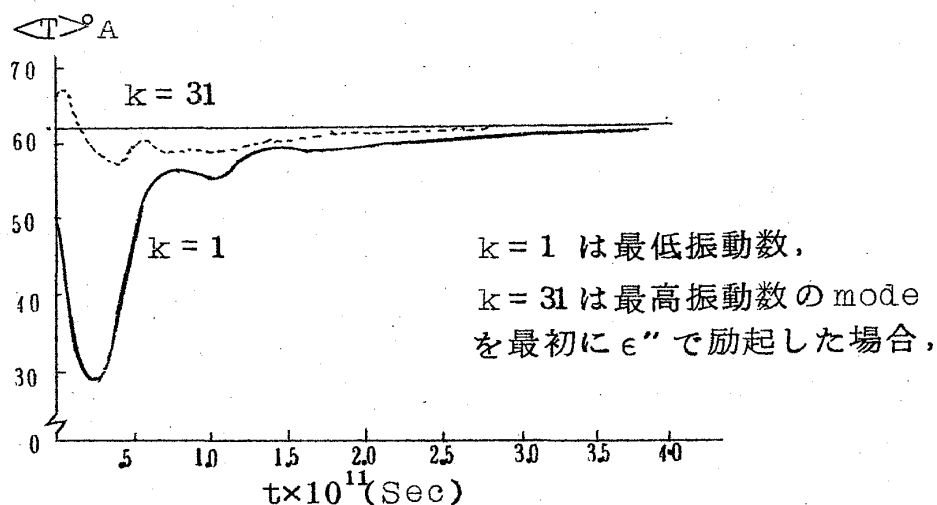


図 5. 温度 (時間平均)

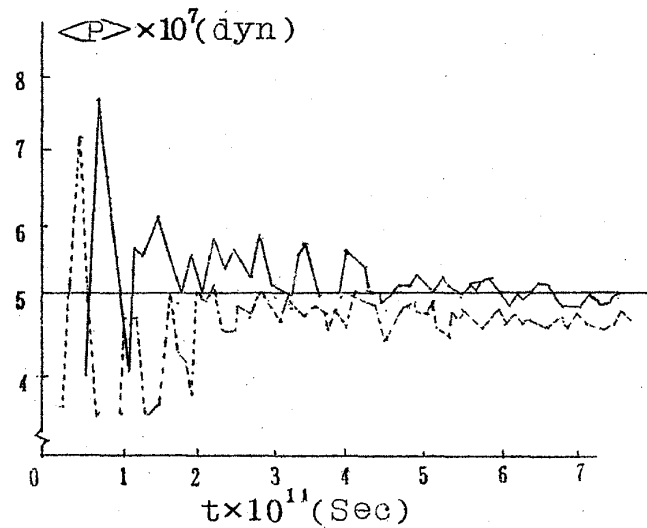


図 6. 圧 力 (時間平均)

条件は図 6 と同じ。

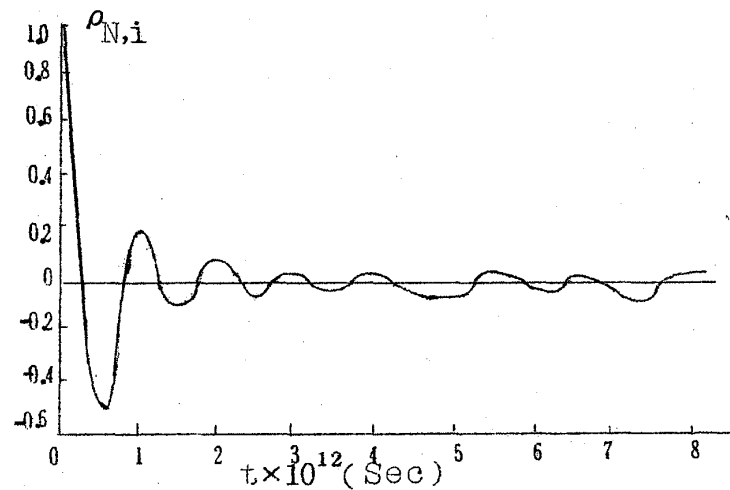


図 7. 運動量自己相関関数

温度はかなり速く平衡値に到達する傾向がある。例えば粒子数として7, 8個をとり低エネルギー ϵ' から出発して150個の衝突をすると熱力学的な温度の4%以内の平均温度に接近する。これに対して圧力はゆるやかに平衡値に近づく。なおエネルギー分配, 熱力学変数の平衡値への接近は粒子数の奇偶にはほとんど関係しない。このモデルではmodeの反対称性のみ衝突によって保存するのでmodeの対称性, 反対称も結論に影響しない。

Nochcote, Potts はエネルギー分配, エルゴード性が非線型力によって

一次元素の非線型力学

保証されられている。しかし剛体球が Ford の Resonant Condition を満足する特別の場合になっている可能性もあり、安易に Ford の反論と解釈すべきではない。N. Saito⁴⁾の計算(電子計算機)は normal mode の存在を示唆している傾向を示し、M. Toda⁵⁾の理論も Soliton(Solitary Wave)の安定性を論じている。また相転移の問題を計算機で解くとき、unit cell にある粒子数によって、転移が起ったり、起らなかったりするという興味あるコメントがあり、非線型力によって以上の問題を数値計算をするとき粒子数が意外に大きい役割を演じる可能性もあり、計算機に独特な制限があることも注意する必要がある。エントロピー関数と揺ぎを数値計算をして H 定理の証明を暗示できるか否かを確かめてみるのも未だ着手されていない問題である。

文 献

- 1) E. Fermi, J. Pasta and S. Ulam. Los Alamos Scientific Laboratory Rept. L.A-1940. '55.
- 2) J. Ford, J. math. Phys. 2, 387. '61. 4 1293 '63.
- 3) E.A. Jackson, J. math. Phys 4 551 '63. 4 686 '63.
- 4) R.S.S. Northcote, R.B. Potts. J. math. Phys. 5 383 '64.
- 5) 齊藤 信彦 「振動子系の力学過程と統計研究会」1964年7月, 1965年11月, 「非線型研究会」1967年1月.
- 6) M. Toda. J. Phys. Soc. Japan (to be published).
「非線型研究会」1967年1月.

一次元非線型振動子系の ergodicity の 計算機による研究

齊 藤 信 彦, 広 岡 一(早大理工)

§ 1. は じ め に

調和振動子系はノーマルモードに分けられるから独立な系の集りであって、